

2.2.24. АБСОРБЦІЙНА СПЕКТРОФОТОМЕТРІЯ В ІНФРАЧЕРВОНОМУ ДІАПАЗОНІ

ПРИНЦИП

Абсорбційна спектроскопія в інфрачервоному діапазоні (також відома як спектроскопія в інфрачервоному (ІЧ) діапазоні) ґрунтується на взаємодії інфрачервоного випромінювання з речовиною. В результаті взаємодії молекули та ІЧ випромінювання виникає поглинання на частотах, які є специфічними для даної молекули, і перехід міжмолекулярних й внутрішньомолекулярних коливань на вищі коливальні рівні. Цим обумовлюється спектр інфрачервоного поглинання з характеристичними смугами, які відповідають функціональним групам молекули.

Діапазон довжин хвиль інфрачервоного випромінювання може бути розділений на три піддіапазони, а саме: ближній, середній і дальній. Загальноприйняті довжини хвиль, що визначають ці піддіапазони, становлять відповідно від 0.8 мкм до 2.5 мкм, від 2.5 мкм до 25 мкм і від 25 мкм до 1000 мкм. Проте в ІЧ-спектроскопії замість довжини хвилі більш загальноживаним є хвильове число, що може бути розраховане за формулою:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \times 10^4,$$

де $\tilde{\nu}$ — хвильове число, що виражене в обернених сантиметрах (см^{-1}), і λ — довжина хвилі, що виражена в мікрометрах.

Зважаючи на це, ділянка від $12\,500\text{ см}^{-1}$ до 4000 см^{-1} є ближнім ІЧ-діапазоном, від 4000 см^{-1} до 400 см^{-1} є середнім ІЧ-діапазоном і від 400 см^{-1} до 10 см^{-1} є дальнім ІЧ-діапазоном.

Ця стаття стосується лише спектроскопії в середньому ІЧ-діапазоні, тобто від 4000 см^{-1} до 400 см^{-1} (від 2.5 мкм до 25 мкм), що надалі для спрощення вживається за текстом як «інфрачервоний діапазон». У цьому діапазоні основні молекулярні коливання функціональних груп виявляються в спектрі як смуги поглинання. Діапазон менше 1500 см^{-1} , відомий як «ділянка відбитків пальців», є досить насиченою та інформативною частиною спектра, що характеризує молекулу, яка досліджується.

Середній ІЧ-діапазон розташований між ближнім ІЧ-діапазоном, де проявляються обертони й комбінації основних коливань переважно функціональних груп С-Н, N-H й О-Н (2.2.40), і дальнім ІЧ-діапазоном, де спостерігаються смуги поглинання, пов'язані зі зміною положень атомів у кристалічній решітці, водневими зв'язками, кутовими деформаційними коливаннями важких атомів і молекулярними обертаннями.

ЗАСТОСУВАННЯ

Оскільки смуги поглинання ІЧ-спектрів є характерними для будови функціональних груп молекули, ІЧ-спектроскопія широко використовується для ідентифікації речовин й отримання інформації щодо їх будови. Цей метод також може бути використаний для кількісного оцінювання, що вимагає встановлення математичного зв'язку між інтенсивністю поглинання випромінювання зразком і вмістом досліджуваного компонента в зразку.

ІЧ-спектроскопія широко використовується у фармацевтичній галузі для хімічного й фізичного аналізу в лабораторії та має різноманітне застосування в процесі виробництва, як викладено далі. Отже, ІЧ-спектроскопія забезпечує застосування процесно-аналітичної технології (англ. — Process Analytical Technology, PAT) як частини передової стратегії управління.

Хімічний аналіз:

- ідентифікація діючих речовин, допоміжних речовин, дозованих форм, проміжних продуктів виробництва, хімікатів і пакувальних матеріалів;
- якісне оцінювання діючих речовин, допоміжних речовин, дозованих форм, проміжних продуктів виробництва й пакувальних матеріалів, включно зі спектральним порівнянням партія-до-партії, та оцінювання зміни постачальника;
- кількісне оцінювання діючих речовин у матриці зразка, визначення вмісту вологи та розчинника;
- кількісне оцінювання вмісту домішок, наприклад у газах і неорганічних матеріалах;
- моніторинг хімічних реакцій, зокрема хімічного синтезу.

Фізичний аналіз:

- визначення твердофазних властивостей, таких як поліморфізм.

ОБМЕЖЕННЯ

Основними обмеженнями використання ІЧ-спектроскопії є такі:

- для однозначної ідентифікації речовини може знадобитися використання додаткових методів;
- чисті енантіомери речовини не можуть бути розрізнені;
- для аналізу залишкових кількостей речовин цей метод може бути непридатним;
- умови пробопідготовки (наприклад, тиск, розчинник) можуть змінювати кристалічну форму речовини, якій властивий поліморфізм;
- для гетерогенних зразків обмежена кількість зразка в пробі може становити проблему.